

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТАДИНАМИКИ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО БАРЬЕРА НУКЛЕАЦИИ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ

Розанов Е.О.^{1*}, Проценко С.П.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук,
Екатеринбург, Россия

*E-mail: yvecme10@gmail.com

USING METADYNAMICS FOR CALCULATING NUCLEATION ENERGY BARRIER OF METASTABLE LIQUID

Rozanov E.O.^{1*}, Protsenko S.P.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Thermal Physics Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Yekaterinburg, Russia

A supercooled Lennard-Jones substance is investigated with the help of metadynamics, which has been shown to produce reliable results in measuring free energy faster than Monte-Carlo methods. To drive the system from the metastable phase, as well as to show which path system chooses for crystallization, local Q6 Steinhardt parameter and potential energy of the system are chosen as collective variables.

Переохлажденная жидкость находится в метастабильном состоянии, из которого она может кристаллизоваться при преодолении ею барьера свободной энергии. Однако, это преодоление является редким событием, и исследование барьера с помощью простой молекулярной динамики крайне неэффективно. Метод метадинамики [1] позволяет вывести систему из метастабильного состояния путем добавления гауссианов энергии, зависящих от заранее выбранных параметров порядка.

Исследование проводилось над системой из 6912 частиц леннард-джонсовского вещества при постоянном давлении 250 бар (температура плавления при таком давлении $T_m = 89.95$ К). Переохлаждение исследовалось при постоянных температурах $0.7 T_m$, $0.75 T_m$ и $0.8 T_m$. В качестве переменных порядка были выбраны потенциальная энергия системы и параметр Стейнхардта Q6 [2] вокруг случайно выбранного атома в сфере, включающей в себя 350 атомов. Выбор параметров метадинамики (высота и ширина гауссианов, частота их добавления) был сделан так, чтобы обеспечить точность определения барьера в пределах $2 kT$.

В результате моделирования были определены величины $11.9 kT$, $22.8 kT$ и $31.1 kT$ для температур $0.7 T_m$, $0.75 T_m$ и $0.8 T_m$ соответственно с учетом погрешности выше. При увеличении переохлаждения барьер свободной энергии уменьшается, и жидкости проще перейти в кристаллическое состояние.

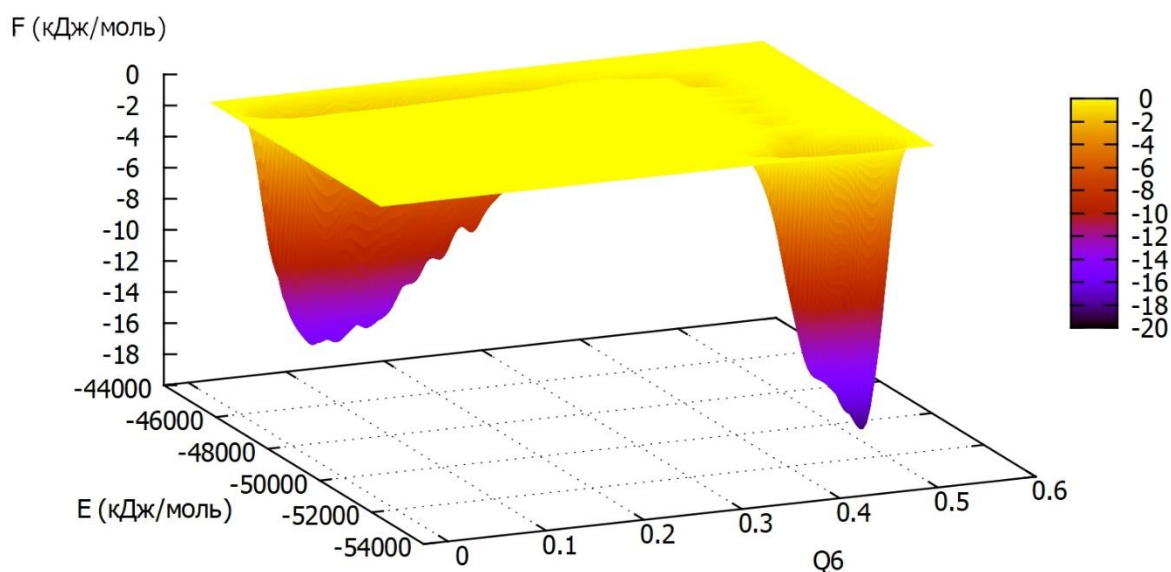


Рис. 1 – Ландшафт свободной энергии в зависимости от выбранных параметров порядка для температуры $0.75 T_m$. Левая яма соответствует метастабильному жидкому состоянию, а правая – кристаллу

1. Laio A. and Parrinello M. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 99, 12562 (2002).
2. Steinhardt P.J. et al. Phys. Rev. B, 28, 784 (1983).

SURFACE MODIFICATION OF STEEL INDUCTOR AS AN APPROACH TO ENHANCE ITS DURABILITY IN HIGH PULSED MAGNETIC FIELDS

Russkikh P.A.^{*1,2}, Spirin A.V.¹, Boltachev G.Sh.¹, Paranin S.N.¹

¹⁾ Institute of Electrophysics UB of RAS, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

*E-mail: russkikh_p@inbox.ru

Abstract. The work concerns both a theoretical analysis of magnetic and thermal effects in conductor with inhomogeneous initial conductivity and realization of this approach on steel, oriented on inductors production, by steel surface modification. Monotonically changing specific resistance of steel was suggested to be realized via steel pack chromizing.

The relevance of the research is due to the use of high-field coils in the technology of magnetic pulse welding of metals. Consideration and reduction of the ohmic heating of the current-carrying layer of the inductor and the thermal stresses and strains associated with it is of key importance for increasing inductor durability.

A promising approach is the realization of an inductor material with initial inhomogeneous resistivity in the current-carrying layer. Here, an analysis of the stress state